

## КОРРЕЛЯЦИЯ ИЗБЫТОЧНОГО МОЛЯРНОГО ОБЪЕМА БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ *n*-АЛКАНОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ УРАВНЕНИЯ ДЖЕЙНА

Уланович А.А.

Научный руководитель – Самуйлов В.С., к.т.н., доцент  
Могилевский государственный университет продовольствия  
г. Могилев, Республика Беларусь

На основе проведенного обзора и анализа имеющихся методов оценки и прогнозирования избыточных термодинамических функций было установлено, что наибольший интерес представляют уравнения, которые обладают прогнозирующими способностями. Среди них уравнения Хиджманса-Холлемана, МакГлашана и Джейна. Наиболее предпочтительным из перечисленных является уравнение Джейна поскольку оно имеет всего один коэффициент аппроксимации, а уравнения Хиджманса-Холлемана и МакГлашана – два. Уравнение Джейна [1] применяется для описания избыточного молярного объема  $V_m^E$  и имеет вид

$$V_m^E = -Ax_1x_2 \left\{ \frac{\chi_2 - {}^3\chi_1}{{}^3\chi_1 {}^3\chi_2} \left[ \chi_1 + x_2 \left( \chi_2 - {}^3\chi_1 \right) \right] \right\} \quad (1)$$

где  $A$  – коэффициент аппроксимации при постоянной температуре и давлении;  $x_1, x_2$  – мольные доли младшего и старшего гомологов соответственно;  ${}^3\chi_1, {}^3\chi_2$  – коэффициенты связности третьей степени младшего и старшего гомологов соответственно. В [1] было установлено, что значение коэффициента связности зависит от числа атомов углерода  $N$

$${}^3\chi_{C_N} = 0.707 + 0.25(N - 5) \quad (2)$$

В [1] коэффициент аппроксимации  $A$  определялся при фиксированных значениях температуры и давления, а затем по полученным данным был представлен в виде экспоненциальной температурной функции. Отличительной особенностью корреляционного уравнения от предложенного в [1] является то, что в данной работе уравнение (1) использовалось для описания  $V_m^E$  не только при атмосферном, но и при повышенном давлении, а также коэффициент аппроксимации  $A$  были представлен в виде аналитической зависимости от температуры и давления. При анализе и обобщении использовались данные по  $V_m^E$  для бинарных жидких смесей *n*-алканов полученные в МГУП и имеющиеся в литературе. При статистической обработке массива имеющихся литературных данных с учетом весовых функций методами нелинейной регрессии определялись значения коэффициента аппроксимации  $A$  при фиксированных значениях температур в интервале 298–433 К и давлений в диапазоне 0.1–100 МПа, для смесей включающих алканы с числами атомов углерода от 6 до 16. Анализ численных значений коэффициента  $A$  показал, что он коррелирует с температурой и давлением. Выявленный характер зависимости коэффициента  $A$  от температуры и давления позволил представить его в аналитической форме и получить таким образом единое уравнение для описания  $V_m^E$ .

Литература:

1. Jain, D.V.S. Correlation between topological features and molar volumes of *n*-alkanes and excess volumes of their binary mixtures / D.V.S. Jain, V.K. Gombur // JCS FT-1. – 1979. – Vol. 75. – P. 1132–1141.